



TITLE:

Multi-physics Properties in Topologically Nanostructured Ferroelectrics(Abstract_要旨)

AUTHOR(S):

Le, Van Lich

CITATION:

Le, Van Lich. Multi-physics Properties in Topologically Nanostructured Ferroelectrics. 京都大学, 2016, 博士(工学)

ISSUE DATE:

2016-09-23

URL:

<https://doi.org/10.14989/doctor.k19991>

RIGHT:

京都大学	博士（工学）	氏名	Le Van Lich
論文題目	Multi-physics Properties in Topologically Nanostructured Ferroelectrics (トポロジカルナノ構造を有する強誘電体におけるマルチフィジックス特性)		
(論文内容の要旨)			
<p>強誘電体は、その自発的な電気分極を利用し、電子デバイスのメモリーやマイクロ・ナノ機械デバイスのアクチュエーター等の微小機器に薄膜として用いられている。また、高機能化・高集積化の要望とともに部材寸法が縮小し、ナノメートルスケールの強誘電体が注目されている。こうしたナノスケールの強誘電材料では表面効果によって形状に依存した特有の性質を示すことが報告され始めているが、その詳細は明らかになっていない。とくに、ナノスケールの要素が階層的に組み合わさったメタマテリアルやナノポーラス材など、内部にナノスケールの幾何学的構造を有するトポロジカルナノ構造は、薄膜やワイヤといった単純な単体ナノ要素とは全く異なる強誘電特性を発現させることが考えられる。本論文は、トポロジカルナノ構造の強誘電特性について、その幾何学構造が与える影響に着目して行った Phase-Field シミュレーションによる研究をまとめたものであり、7 章からなっている。</p> <p>第 1 章は緒論であり、研究の背景および本論文の目的を述べている。まず、ペロブスカイト酸化物の強誘電特性の基礎を示すとともに、材料表面部に生じる電荷が電気分極に及ぼす影響について説明している。とくに、ナノメートルスケールの構造体ではマクロ材とは異なる分極パターンが発現することを指摘するとともに、そのパターンが材料形状によって変化する可能性があることを論じている。また、内部にナノスケールの幾何学的な階層構造を有するナノメタマテリアルやポーラス材では、薄膜やワイヤなどの単一要素とは異なり、要素間の非線形相互作用や階層構造の影響が支配的となり、特殊な内部構造が現れる可能性を指摘している。さらに、これらの課題に対し、自由エネルギーに基づく Phase-Field 解析の有効性と有用性を論じた後に、このトポロジカルナノ構造中の分極には多様なパターンが現れることを指摘し、本研究の目的を明確に示している。</p> <p>第 2 章は、トポロジカルナノ構造を構成する基本要素のひとつであるナノき裂の強誘電性について検討している。通常の直線的な分極とは異なり、ナノき裂では周囲に渦状の分極秩序が形成されることを発見している。また、トポロジカルナノ構造が力学的負荷を受ける場合には、その端部に応力が集中し、同部から分極反転が生じることでこの渦状分極の分裂・増殖が生じることを示した。これは、強誘電体が有する圧電効果による寄与が大きいことを示している。さらに、この渦状分極分裂・増殖によるき裂端部の応力緩和により、破壊じん性の向上が期待できることを示している。</p> <p>第 3 章は、強誘電ナノメタマテリアル中の分極秩序について検討している。アルキメデス格子に基づき二次元メタマテリアルをモデル化すること</p>			

京都大学	博士（工学）	氏名	Le Van Lich
<p>で、基本的な幾何形状の影響を抽出している。メタマテリアル内部には、その幾何形状に依存して、直線状ならびに渦状の組み合わせから成る周期的な分極秩序が現れることを発見しており、大きく4つのパターンに分類できることを示している。さらに、この新奇な分極秩序はメタマテリアル内部の格子の連結部の偶奇性によって支配されていることを明らかにしている。これにより、内部の分極秩序をメタマテリアルの幾何形状によって設計できることを示唆している。</p> <p>第4章は、強誘電ナノメタマテリアルの電気力学的応答（圧電特性）について検討している。均質材では達成し得ない正の横圧電係数や異方性がナノメタマテリアルに現れることを発見しており、これらの特性が前章にて示したメタマテリアル特有の分極秩序に起因することを示している。さらに、渦状分極にもひずみ応答特性が存在することを示すとともに、これを新たな材料特性 piezotoroidicity として定義・提唱している。すなわち、トポロジカルナノ構造により、圧電応答を設計することが出来ることを示している。</p> <p>第5章は、強誘電体 BaTiO₃ と強磁性体 CoFe₂O₄ のナノ複合メタ材料の分極・磁気モーメント秩序とそれらの相互作用（電気磁気効果）について検討している。ナノ複合メタ材料中には、ナノスケールの層状ならびに架橋状の分極・磁気ドメインが周期的かつ階層的に形成されることを明らかにしている。また、ナノ複合メタ材料は、マクロな複合材よりも数桁高い電気磁気効果を示すことを見出しており、これが特徴的な層状・架橋状ドメイン構造に起因するものであることを明らかにしている。</p> <p>第6章は、分極ドメイン反転や強誘電相転移など、力場ならびに電場の複合場によって生じる強誘電体中の分極秩序の不安定現象の本質的な理解のため、不安定性のクライテリオンを理論的に導出している。この提案手法は、強誘電体が有する自由エネルギーと外部負荷によるエネルギーバランスを考慮し、全エネルギーの分極等に対する二階微分からなるヘッセ行列の固有値の正值性により、系の不安定性を厳密に評価できる。さらに、ナノ薄膜やナノプレート中のドメイン反転現象に対して本理論を適用し、その妥当性を実証している。</p> <p>第7章は結論であり、本論文で得られた成果について要約している。</p>			

(論文審査の結果の要旨)

本論文は、次世代の電子機器への応用が期待されるメタマテリアルなど内部にナノスケールの幾何学な階層構造を有するトポロジカルナノ構造の強誘電特性を明らかにすることを目的に研究した成果についてまとめたものであり、得られた主な成果は次のとおりである。

(1) トポロジカルナノ構造を構成する代表要素のき裂について Phase-Field 解析を行い、き裂周囲に closure domain と呼ばれる特有の渦状分極が形成することを見出した。また、力学的負荷を受ける場合には、応力集中によりき裂を起点に closure domain が分裂・増殖することを示した。

(2) 強誘電ナノメタマテリアル内部の分極秩序について解析を行い、内部の幾何的特徴に応じて直線状・渦状が組み合わさった周期的な分極パターンが形成されることを見出した。また、これは、内部格子の連結部の偶奇性によって特徴づけられることを明らかにした。

(3) ナノメタマテリアルの電気-力学的応答について解析を実施し、均質材では達成し得ない正の圧電応答や新しい機能 piezotoroidicity が現れることを見出した。また、これらの特性は内部の幾何的形状に依存することを示した。

(4) 強誘電体/強磁性体のナノ複合メタ材料について解析を行い、内部にナノスケールの層状ならびに架橋状の分極・磁気ドメインが形成され、マクロ材よりも数桁高い電気磁気効果が現れることを見出した。また、これらの特徴・性質はナノ複合メタ材料の内部幾何形状に依存することを示した。

(5) ドメイン反転や相変態など、力場ならびに電場の複合場によって生じる強誘電体中の複雑な不安定現象の本質的な理解のため、そのクライテリアを理論的に導出した。ナノ薄膜やナノプレート中のドメイン反転現象に対して本理論を適用し、その妥当性を実証した。

以上のように、本論文は、トポロジカルナノ構造中に現れる特異な分極秩序や機能、ならびにそれらの内部幾何的形状との関連性について Phase-Field 解析により明らかにしたものであり、学術上、實際上、寄与するところが少なくない。よって、本論文は博士（工学）の学位論文として価値あるものと認める。また、平成 28 年 8 月 1 日、論文内容とそれに関連した事項について試問を行って、申請者が博士後期課程学位取得基準を満たしていることを確認し、合格と認めた。